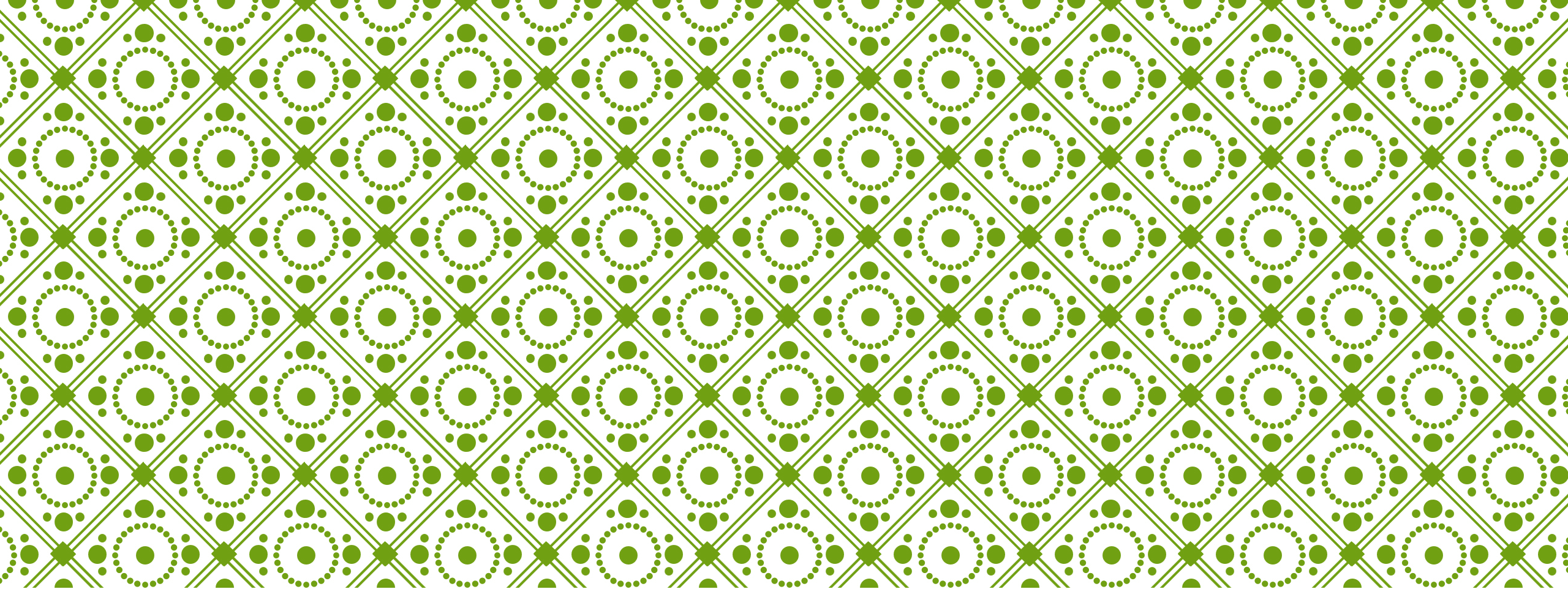


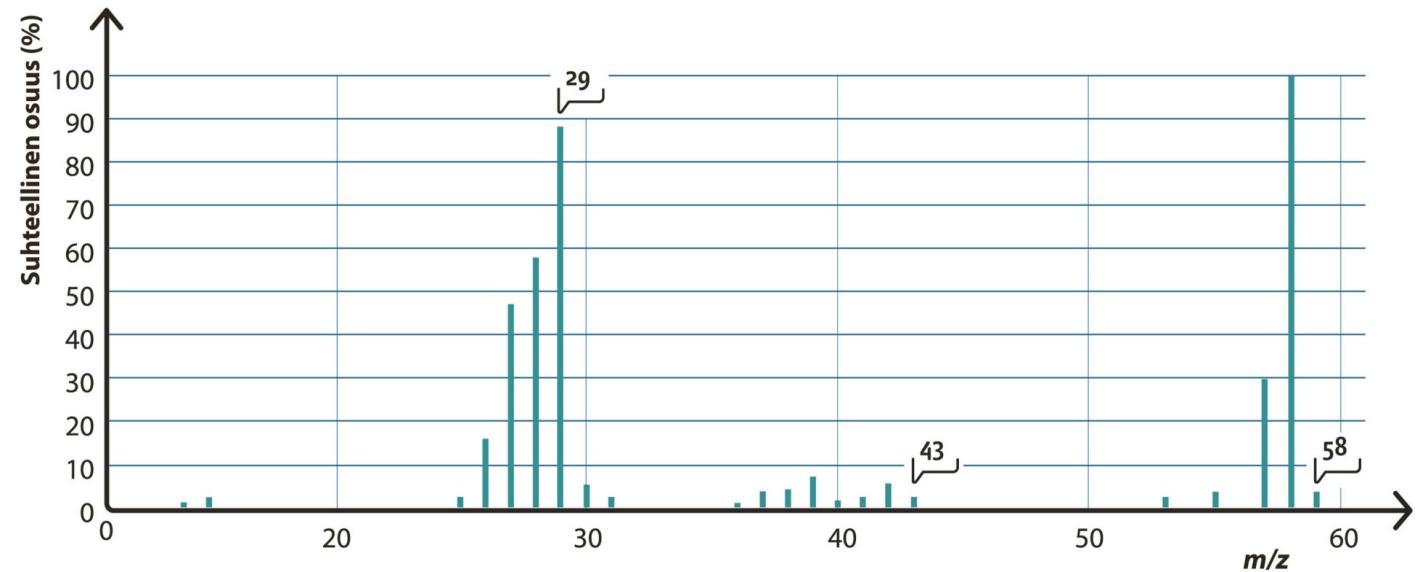


KE3

Kappale 2.2
21.02.2022

KPL2.1: ESIMERKKI 4 MOLEKYYYLIKAAVAN RATKAISEMINEN MOOLIMASSASTA

- Spektriaineelle jonka suhdekaava on C_3H_6O
- m/z arvo molekyyli-ionin moolimassan ja varauksen itseisarvon suhde
- Suurin piikki vastaa yhdisteen molekyylimassaa



MALLIRATKAISU

Suhdekaava = C_3H_6O

$M(\text{yhdiste}) = 58 \text{ g/mol}$

Lasketaan yhden suhdekaavayksikön C_3H_6O moolimassa.

$M(C_3H_6O) = (3 \cdot 12,01 + 6 \cdot 1,008 + 16,00) \text{ g/mol} = 58,078 \text{ g/mol}$.

Ratkaistaan, kuinka moninkertainen koko yhdisteen moolimassa on suhdekaavayksikön moolimassaan verrattuna. Ratkaisu saadaan laskemalla $x:n$ arvo lausekkeesta

$$x \cdot 58,078 \text{ g/mol} = 58 \text{ g/mol}$$

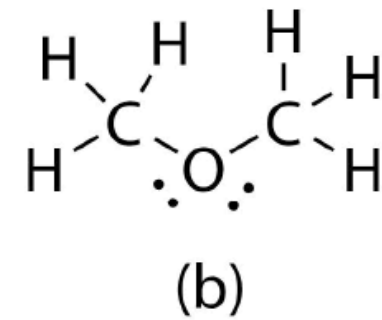
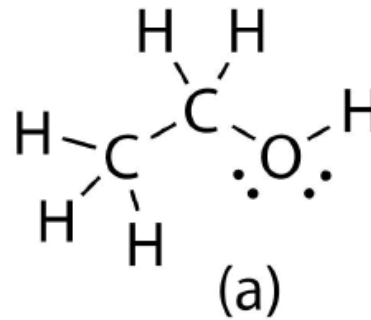
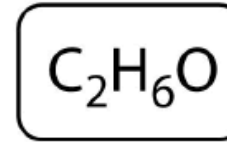
$$\Rightarrow x = 1,001$$

Ratkaisusta voidaan päätellä, että yhdisteen moolimassa on yhtä suuri kuin suhdekaavayksikön moolimassa. Tämän perusteella yhdisteen molekyylikaava on sama kuin suhdekaava.

Vastaus: Molekyylikaava on C_3H_6O .

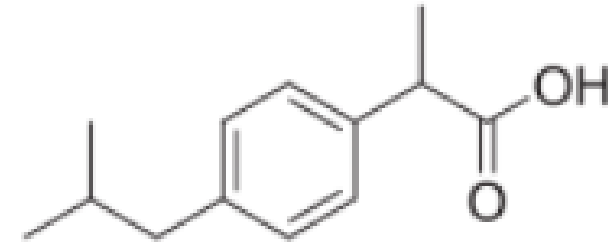
2.2 RAKENNEKAAVA

- Molekyylikaava kertoo atomien todelliset lukumäärät molekyylissä
- Rakennekaavasta selviää atomien väliset sidokset
- Rakennekaavan avulla voidaan antaa yhdisteelle sen täsmällinen nimi
- Tiivistetty rakennekaava ei näytä kaikkia sidoksia, mutta atomien keskinäinen sitoutuminen voidaan siitä päätellä



Butanoli: $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ tai $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

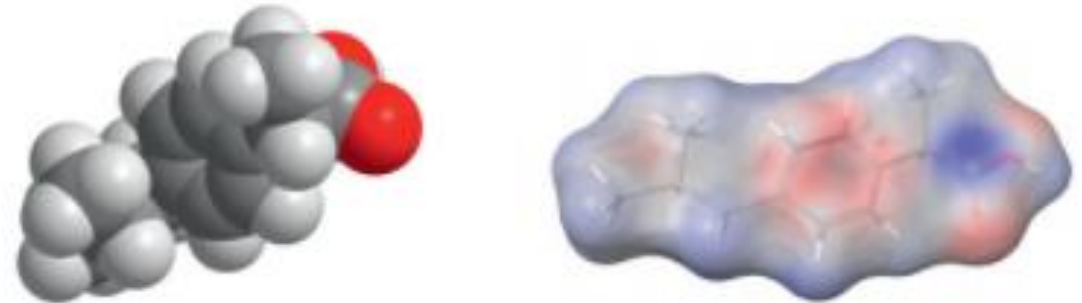
➤ Viivakaavassa piirretään näkyviin hiiliketju sekä funktionaaliset ryhmät ja muut atomit jotka ovat rakenteen kannalta tärkeitä



➤ Tietokoneet ovat mahdollistaneet monet erilaiset molekyylihallinnukset laskennallisesti sekä 3D- muodossa

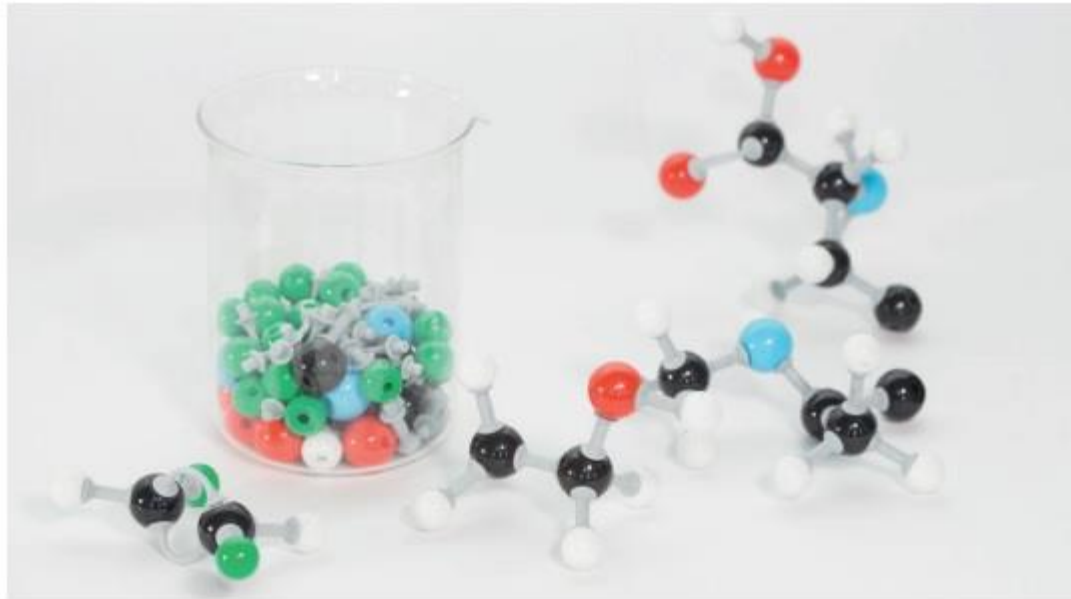
➤ Tietokonemallinnusta käytetään apuna paljon teollisuudessa

➤ Huom! Mallinnukset ovat vain suuntaa antavia ja tulokset on varmistettava aina tutkimuksella



Kuvassa Ibuprofeenimolekyyli erilaisin mallein

MOLEKYYLIMALLIEN VÄREILLÄ ON MERKITYS



➤ Värit!

- Hiili = musta
- Vety = valkoinen
- Happi = Punainen
- Typpi = Sininen
- Rikki = Keltainen
- Halogeenit = Vihreä (yleensä)